



# VERTRAG ÜBER DIE INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS

## PCT

### INTERNATIONALER VORLÄUFIGER BERICHT ÜBER DIE PATENTIERBARKEIT

(Kapitel II des Vertrags über die internationale Zusammenarbeit auf dem Gebiet des Patentwesens)

Aktenzeichen des Anmelders oder Anwalts 0000055302	<b>WEITERES VORGEHEN</b> siehe Formblatt PCT/PEA/416	
Internationales Aktenzeichen PCT/EP2005/000772	Internationales Anmeldedatum (Tag/Monat/Jahr) 27.01.2005	Prioritätsdatum (Tag/Monat/Jahr) 29.01.2004
Internationale Patentklassifikation (IPK) oder nationale Klassifikation und IPK C07C253/10, C07C255/07		
Anmelder BASF AKTIENGESELLSCHAFT		
<p>1. Bei diesem Bericht handelt es sich um den internationalen vorläufigen Prüfungsbericht, der von der mit der internationalen vorläufigen Prüfung beauftragten Behörde nach Artikel 35 erstellt wurde und dem Anmelder gemäß Artikel 36 übermittelt wird.</p> <p>2. Dieser BERICHT umfaßt insgesamt 4 Blätter einschließlich dieses Deckblatts.</p> <p>3. Außerdem liegen dem Bericht ANLAGEN bei; diese umfassen</p> <p>a. <input checked="" type="checkbox"/> (an den Anmelder und das Internationale Büro gesandt) insgesamt 3 Blätter; dabei handelt es sich um</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Blätter mit der Beschreibung, Ansprüchen und/oder Zeichnungen, die geändert wurden und diesem Bericht zugrunde liegen, und/oder Blätter mit Berichtigungen, denen die Behörde zugestimmt hat (siehe Regel 70.16 und Abschnitt 607 der Verwaltungsvorschriften).</p> <p><input type="checkbox"/> Blätter, die frühere Blätter ersetzen, die aber aus den in Feld Nr. 1, Punkt 4 und im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde eine Änderung enthalten, die über den Offenbarungsgehalt der internationalen Anmeldung in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgeht.</p> <p>b. <input type="checkbox"/> (nur an das Internationale Büro gesandt) insgesamt (bitte Art und Anzahl der/des elektronischen Datenträger(s) angeben), der/die ein Sequenzprotokoll und/oder die dazugehörigen Tabellen enthält/enthalten, nur in computerlesbarer Form, wie im Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll angegeben (siehe Abschnitt 802 der Verwaltungsvorschriften).</p>		
<p>4. Dieser Bericht enthält Angaben zu folgenden Punkten:</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Feld Nr. I Grundlage des Bescheids</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. II Priorität</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. III Keine Erstellung eines Gutachtens über Neuheit, erfinderische Tätigkeit und gewerbliche Anwendbarkeit</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. IV Mangelnde Einheitlichkeit der Erfindung</p> <p><input checked="" type="checkbox"/> Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35(2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. VI Bestimmte angeführte Unterlagen</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. VII Bestimmte Mängel der internationalen Anmeldung</p> <p><input type="checkbox"/> Feld Nr. VIII Bestimmte Bemerkungen zur internationalen Anmeldung</p>		
Datum der Einreichung des Antrags  21.11.2005	Datum der Fertigstellung dieses Berichts  28.03.2006	
Name und Postanschrift der mit der internationalen Prüfung beauftragten Behörde   Europäisches Patentamt D-80298 München Tel. +49 89 2399 - 0 Tx: 523656 epmu d Fax: +49 89 2399 - 4465	Bevollmächtigter Bediensteter  Kleidermigg, O  Tel. +49 89 2399-2143  	

---

**Feld Nr. I Grundlage des Berichts**

---

1. Hinsichtlich der **Sprache** beruht der Bericht auf der internationalen Anmeldung in der Sprache, in der sie eingereicht wurde, sofern unter diesem Punkt nichts anderes angegeben ist:
- ☐ Der Bericht beruht auf einer Übersetzung aus der Originalsprache in die folgende Sprache, bei der es sich um die Sprache der Übersetzung handelt, die für folgenden Zweck eingereicht worden ist:
    - ☐ internationale Recherche (nach Regeln 12.3 und 23.1 b))
    - ☐ Veröffentlichung der internationalen Anmeldung (nach Regel 12.4)
    - ☐ internationale vorläufige Prüfung (nach Regeln 55.2 und/oder 55.3)
2. Hinsichtlich der **Bestandteile\*** der internationalen Anmeldung beruht der Bericht auf (*Ersatzblätter, die dem Anmeldeamt auf eine Aufforderung nach Artikel 14 hin vorgelegt wurden, gelten im Rahmen dieses Berichts als "ursprünglich eingereicht" und sind ihm nicht beigelegt*):

**Beschreibung, Seiten**

1-24 in der ursprünglich eingereichten Fassung

**Ansprüche, Nr.**

1-13 eingegangen am 21.11.2005 mit Schreiben vom 17.11.2005

☐ einem Sequenzprotokoll und/oder etwaigen dazugehörigen Tabellen - siehe Zusatzfeld betreffend das Sequenzprotokoll

3. ☐ Aufgrund der Änderungen sind folgende Unterlagen fortgefallen:
- ☐ Beschreibung: Seite
  - ☐ Ansprüche: Nr.
  - ☐ Zeichnungen: Blatt/Abb.
  - ☐ Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):
  - ☐ etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):
4. ☐ Dieser Bericht ist ohne Berücksichtigung (von einigen) der diesem Bericht beigelegten und nachstehend aufgelisteten Änderungen erstellt worden, da diese aus den im Zusatzfeld angegebenen Gründen nach Auffassung der Behörde über den Offenbarungsgehalt in der ursprünglich eingereichten Fassung hinausgehen (Regel 70.2 c)).
- ☐ Beschreibung: Seite
  - ☐ Ansprüche: Nr.
  - ☐ Zeichnungen: Blatt/Abb.
  - ☐ Sequenzprotokoll (*genaue Angaben*):
  - ☐ etwaige zum Sequenzprotokoll gehörende Tabellen (*genaue Angaben*):

\* Wenn Punkt 4 zutrifft, können einige oder alle dieser Blätter mit der Bemerkung "ersetzt" versehen werden.

---

**Feld Nr. V Begründete Feststellung nach Artikel 35 (2) hinsichtlich der Neuheit, der erfinderischen Tätigkeit und der gewerblichen Anwendbarkeit; Unterlagen und Erklärungen zur Stützung dieser Feststellung**

---

1. Feststellung
- |                                |                     |
|--------------------------------|---------------------|
| Neuheit (N)                    | Ja: Ansprüche 3-13  |
|                                | Nein: Ansprüche 1,2 |
| Erfinderische Tätigkeit (IS)   | Ja: Ansprüche 3-13  |
|                                | Nein: Ansprüche 1,2 |
| Gewerbliche Anwendbarkeit (IA) | Ja: Ansprüche: 1-13 |
|                                | Nein: Ansprüche:    |

2. Unterlagen und Erklärungen (Regel 70.7):

**siehe Beiblatt**

**Zu Punkt V.**

1 Es wird auf die folgenden Dokumente verwiesen:

D1 : EP 0 274 401 A (E.I. DU PONT DE NEMOURS AND COMPANY) 13. Juli 1988  
(1988-07-13)

D2 : WO 99/07671 A (BASF AKTIENGESELLSCHAFT; FISCHER, JAKOB;  
SIEGEL, WOLFGANG) 18. Februar 1999 (1999-02-18)

Die vorliegende Anmeldung betrifft ein Verfahren zur kontinuierlichen Hydrocyanierung von 1,3-Butadien in Gegenwart mindestens eines Katalysators dadurch gekennzeichnet, daß man als Katalysatoren Nickel(0)-Katalysatoren, die mit phosphorhaltigen Chelatliganden stabilisiert sind, 1,3-Butadien und Cyanwasserstoff in einem molaren Verhältnis von 1.6 - 1.1 zu 1 verwendet.

D1 (vgl. Ansprüche 1-7, Seite 2, Zeilen 40, 47) stellt den nächstliegenden Stand der Technik dar und offenbart ein kontinuierliches Verfahren zur Hydrocyanierung von 1,3-Butadien in Gegenwart eines Nickel(0)-Katalysators (vgl. Seite 2, Zeile 6) mit Phosphitester Liganden vom Phenol, m-Cresol und p-Cresol bei einem BD/HCN-Verhältnis von 1.33/1. Die Phosphitester Liganden werden als mehrzählige Liganden angesehen, die in der Lage sind mehrere Bindungen mit dem gleichen Zentralatom einzugehen wodurch ein oder mehrere Ringe gebildet werden. Somit sind die in D1 offenbarten Katalysatoren Nickel(0)-Katalysatoren, die mit phosphorhaltigen Chelatliganden stabilisiert sind. Daher ist D1 neuheitschädlich für den Gegenstand der Ansprüche 1 und 2.

Die in den abhängigen Ansprüche 3-13 enthaltene Merkmalskombination ist aus dem vorliegenden Stand der Technik weder bekannt, noch wird sie durch ihn nahegelegt. Die Gründe dafür sind die folgenden: D1 unterscheidet sich vom Gegenstand des Anspruchs 3 dadurch, daß in D1 die Hydrocyanierung nicht in Gegenwart einer Lewisäure durchgeführt wird, dies wird dem Fachmann durch den nächstliegenden Stand der Technik von D1 nicht nahegelegt.

## Patentansprüche

1. Verfahren zur kontinuierlichen Hydrocyanierung von 1,3-Butadien in Gegenwart mindestens eines Katalysators, dadurch gekennzeichnet, dass man als Katalysatoren Nickel(0)-Katalysatoren, die mit phosphorhaltigen Chelatliganden stabilisiert sind, 1,3-Butadien und Cyanwasserstoff in einem molaren Verhältnis von 1,6 bis 1,1 zu 1 verwendet.  
5
2. Verfahren nach Anspruch 1, dadurch gekennzeichnet, dass der Nickel(0)-Katalysator mit phosphorhaltigen Chelatliganden abgesättigt ist, wobei die phosphorhaltigen Chelatliganden ausgewählt sind aus der Gruppe, bestehend aus bidentaten Phosphiten, Phosphinen, Phosphoniten, Phosphiniten und Phosphinitphosphiten.  
10
3. Verfahren nach Anspruch 1 oder 2, dadurch gekennzeichnet, dass die kontinuierliche Hydrocyanierung zusätzlich in Gegenwart mindestens einer Lewis-Säure durchgeführt wird.  
15
4. Verfahren nach einem der Ansprüche 1 bis 3, gekennzeichnet durch die folgenden Verfahrensschritte:  
20
  - (a) kontinuierliche Hydrocyanierung von 1,3-Butadien in Gegenwart mindestens eines Nickel(0)-Katalysators mit Chelatliganden und gegebenenfalls in Gegenwart mindestens einer Lewis-Säure, wobei 1,3-Butadien und Cyanwasserstoff in einem molaren Verhältnis von 1,6 bis 1,1 zu 1 verwendet werden und eine Mischung 1 erhalten wird, die 3-Pentennitril und 2-Methyl-3-butennitril enthält;  
25
  - (c) kontinuierliche Isomerisierung von 2-Methyl-3-butennitril, das in der Mischung 1 enthalten ist, an mindestens einem gelösten oder dispergierten Isomerisierungskatalysator zu 3-Pentennitril, wobei eine Mischung 2 resultiert.  
30
5. Verfahren nach Anspruch 4, dadurch gekennzeichnet, dass das in Verfahrensschritt (c) erhaltene 3-Pentennitril in Gegenwart mindestens eines Nickel(0)-Katalysators mit phosphorhaltigen Liganden hydrocyaniert wird.  
35
6. Verfahren nach Anspruch 4 oder 5, dadurch gekennzeichnet, dass die Isomerisierung in Verfahrensschritt (c) durch Erhitzen der Mischung 1 auf 80 bis 125 °C erfolgt.  
40

7. Verfahren nach einem der Ansprüche 4 bis 6, dadurch gekennzeichnet, dass die in Verfahrensschritt (c) durchgeführte kontinuierliche Isomerisierung in Gegenwart mindestens einer Lewis-Säure durchgeführt wird.
- 5 8. Verfahren nach einem der Ansprüche 4 bis 7, dadurch gekennzeichnet, dass zwischen Verfahrensschritt (a) und Verfahrensschritt (c) folgender Verfahrensschritt (b) durchlaufen wird:
- 10 (b) destillative Entfernung von 1,3-Butadien aus der Mischung 1.
9. Verfahren nach einem der Ansprüche 4 bis 8, dadurch gekennzeichnet, dass der in Verfahrensschritt (c) verwendete Isomerisierungskatalysator der in Verfahrensschritt (a) verwendete Nickel(0)-Katalysators mit Chelatliganden ist.
- 15 10. Verfahren nach den Ansprüchen 1 bis 9, dadurch gekennzeichnet, dass man die Hydrocyanierung in Gegenwart von zusätzlichen monodentaten phosphorhaltigen Liganden, ausgewählt aus der Gruppe, bestehend aus Phosphinen, Phosphiten, Phosphiniten und Phosphoniten durchführt.
- 20 11. Verfahren nach Anspruch 10, dadurch gekennzeichnet, dass man als zusätzlichen monodentaten phosphorhaltigen Ligand ein Ligand der Formel II



25 in der

$X^1, X^2, X^3$  unabhängig voneinander Sauerstoff oder Einzelbindung und  $R^1, R^2, R^3$  unabhängig voneinander gleiche oder unterschiedliche organische Reste bedeuten oder deren Gemische, einsetzt.

30

12. Verfahren nach den Ansprüchen 10 und 11, dadurch gekennzeichnet, dass man Verbindungen der Formel II a



35

einsetzt, wobei w, x, y und z eine natürliche Zahl bedeuten und folgende Bedingungen gelten:

$$w + x + y + z = 3 \text{ und } w, z \leq 2.$$

40

13. Verfahren nach den Ansprüchen 10 bis 12, dadurch gekennzeichnet, dass der zusätzliche monodentate phosphorhaltige Ligand des Nickel(0)-Komplexes

27

und/oder der zusätzliche monodentate freie phosphorhaltige Ligand ausgewählt ist aus Tritolylphosphit sowie den Phosphiten der Formel II b



5

worin  $R^1$ ,  $R^2$  und  $R^3$  unabhängig voneinander o-Isopropyl-phenyl, m-Tolyl und p-Tolyl,  $R^4$  Phenyl ist; x 1 oder 2 ist, und y, z, p unabhängig voneinander 0, 1 oder 2 sind mit der Maßgabe, dass  $x + y + z + p = 3$  ist, und deren Mischungen.

10